



Title	ニッケル砒素型遷移金属化合物の磁性の理論的研究
Author(s)	加藤, 敬子
Citation	大阪大学, 1986, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/35174">https://hdl.handle.net/11094/35174</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・(本籍)	加藤敬子
学位の種類	工学博士
学位記番号	第 7298 号
学位授与の日付	昭和 61 年 3 月 25 日
学位授与の要件	基礎工学研究科 物理系専攻 学位規則第 5 条第 1 項該当
学位論文題目	ニッケル砒素型遷移金属化合物の磁性の理論的研究
(主査) 論文審査委員	教授 望月 和子
(副査) 教 授	中村 伝 教 授 朝山 邦輔

### 論文内容の要旨

NiAs 型遷移金属化合物は変化に富んだ磁気秩序を示す。また、結晶構造についても、全温度領域で NiAs 型構造を示すもの、NiAs 型から MnP 型へ構造相転移をおこすものなど様々である。これらの磁気的性質及び構造相転移を理解する上で、3d電子の局在性が強いのか、あるいは遍歴性が強いのかを知ることが根本となる。

第 1 章では、セルフコンシスティント APW 法を用いてバンド計算を行なった。まず、MnAs, CrAs, MnSb, CrSb, VS, TiSe の非磁性状態のバンドを求め、バンド幅、p-d 混成などの特徴を系統的に調べた。また、状態密度と磁気秩序の関連を議論した。次に、強磁性を示すことが実験的に知られている MnAs, MnSb の強磁性状態のバンド計算を行なった。磁気モーメント及びフェルミレベルにおける状態密度の値は実験値とよく一致し、特に、As 及び Sb サイトにも Mn と逆向きの磁気モーメントが存在することを示した。また、計算で得られた状態密度の形は、XPS スペクトルとよく対応している。MnAs の MnP 型に歪んだ相のバンド計算も行ない、歪みによる状態密度の変化、磁気モーメントの変化を調べた。MnAs の強磁性状態におけるスピノ波スペクトルの計算から、大きな波数に対してスペクトルの幅が広がるという遍歴電子系に特徴的な結果を得た。また、強磁性状態のバンドの交換分裂から見積った単一バンドに対する原子内クーロン積分の値は約 5 eV で、d バンド幅と同程度になっている。このことは、これらの化合物では d 電子の遍歴性と電子相關の効果が共に重要であることを示唆している。

第 2 章では、MnAs 及び  $MnAs_{1-x}P_x$  の有限温度における磁性を遍歴電子の立場からスピノのゆらぎの効果を取り入れて調べた。第 1 章で得られた状態密度を用いて、常磁性帶磁率、強磁性相及び常磁

性相での磁気モーメント、体積の温度変化を計算した。高温のNiAs型相で求めた常磁性帶磁率は僅かに湾曲したキュリーウィス的振舞を示し、定性的に実験と一致する結果を得た。特に、MnP型に歪んだ相における常磁性帶磁率と体積の温度変化の異常な振舞を、歪みによるバンドの変形によって局在モーメントが変化することと結びつけて説明した。また、MnAsの磁化過程を調べ、実験で観測されているメタ磁性転移は、MnP型からNiAs型への構造変化を伴うことを明らかにした。

第3章では、NiAs型からMnP型への構造相転移の機構について調べた。APW法に基づいて、NiAs型のMnAs, CrAs, MnSb, CrSb, VS, TiSeについて、電子格子相互作用係数の波数依存性を計算した。さらに、MnP型の変形による電子系のエネルギーの下がりを議論し、MnAs, CrAs, VSではエネルギーの下がりが大きく、一方、MnSb, CrSb, TiSeでは小さいという結果を得た。この結果は、前者三物質がNiAs型からMnP型への構造相転移を示すが、後者三物質は示さないという実験事実と対応している。

#### 論文の審査結果の要旨

本論文は遷移金属元素とS, SeおよびAs, Sbから作られる種々のNiAs型化合物の磁性と構造相転移の機構を遍歴電子の立場で、統一的に解明したものである。

第一に、MnAs, MnSb, CrAs, CrSb, VS, TiSeの電子帯をセルフコンシステントAPW法を用いて計算し、これらの化合物の物性に重要な働きを担う3d電子は、電子相関のかなり強い遍歴電子として扱わなければならないことを明白にしている。さらに、非磁性状態の状態密度を求めてMn化合物だけが強磁性になりやすいことを示すとともに、強磁性状態のバンド計算もおこなって、磁気モーメントはMnサイトにだけでなく、AsやSbサイトにも逆向きに誘起されることを見出し、中性子回折の測定結果とよい一致をみた。次に、バンド計算の結果を基にして、MnAsの有限温度の磁性と種々のNiAs型化合物の格子の不安定性に関する理論を展開している。スピンのゆらぎの効果を取り入れることによってNiAs型相で観測されている常磁性帶磁率のCurie-Weiss的な温度変化を説明し、さらにMnP型相にみられる常磁性帶磁率と体積の異常な温度変化をスピンのゆらぎの理論に結晶の歪みの効果を取り入れることによって解明した。また、NiAs型からMnP型への変形のおこりやすさを決定する重要な要因は、電子格子相互作用係数の波数依存性とフェルミ・レベル近傍のバンドの振舞いであることを明白にした。

以上のように、本研究は一連のNiAs型化合物のバンド構造を統一的に初めて明らかにし、さらにバンド構造に基づいてMnAsの興味ある磁性を解明するとともに、NiAs型からMnP型への構造相転移の機構をband Jahn-Teller効果という見地から解明した新しい仕事である。よって、本論文は博士論文として十分の価値があると認める。